



# Classification binaire et modèle

Gérard Govaert

## ► To cite this version:

Gérard Govaert. Classification binaire et modèle. [Rapport de recherche] RR-0949, INRIA. 1988, pp.14. inria-00075610

**HAL Id: inria-00075610**

**<https://inria.hal.science/inria-00075610>**

Submitted on 24 May 2006

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNITE DE RECHERCHE  
INRIA-LORRAINE

Institut National  
de Recherche  
en Informatique  
et en Automatique

Domaine de Voluceau  
Rocquencourt  
BP105  
78153 Le Chesnay Cedex  
France  
Tél. (1) 39 63 55 11

# Rapports de Recherche

N° 949

*Programme 5*

## CLASSIFICATION BINAIRE ET MODELE

Gérard GOVAERT

Décembre 1988



2953

# CLASSIFICATION BINAIRE ET MODELE

## BINARY CLUSTER ANALYSIS AND MODELS

Gérard GOVAERT  
Université de Metz et INRIA-Lorraine

### Résumé

Les liens existant entre les méthodes de classification automatique et les modèles de statistique inférentielle ont surtout été étudiés lorsque les données sont quantitatives. Le critère d'inertie interclasse est alors associé à un mélange gaussien (Scott et Symons 1971, Schroeder 1976, Celeux 1988).

Nous nous proposons ici de le faire lorsque les données sont binaires. Nous montrons comment l'identification d'un mélange de distributions de Bernoulli avec le même paramètre pour toutes les classes et toutes les variables correspond à un critère de classification binaire utilisant la distance  $L_1$  et des noyaux binaires. Nous avons généralisé ce modèle en prenant des paramètres qui dépendent des variables mais qui sont toujours les mêmes pour toutes les classes. Enfin, nous terminons par le cas le plus général : cette fois, les paramètres peuvent varier suivant les classes et les variables. On retrouve le modèle des classes latentes traité par Celeux.

Mots-clés : Classification binaire, distance  $L_1$ , mélange de lois de probabilité, modèle des classes latentes.

### Abstract

The relations between clustering methods and statistical models have been studied when the data are continuous. Then the inertia criterion is associated with gaussian mixture (Scott et Symons 1971, Schroeder 1976, Celeux 1988).

Here, we propose to study this relations when the data are binary. We show how the identification of a mixture of Bernoulli distributions with the same parameter for all classes and all variables correspond to a clustering criterion which uses  $L_1$  distance and binary kernels. We have generalized this model, at first by selecting parameters which can depend on variables and finally by selecting parameters which can not only depend on the variables but also on classes. In this case, we obtain the latent classe model.

Keywords : Binary clustering,  $L_1$  distance, mixture, latent classe models.

## INTRODUCTION

De nombreuses méthodes de classification reposent essentiellement sur la définition d'une métrique et d'un critère associé sans faire référence explicitement à des modèles probabilistes. En réalité, comme Celeux le propose (1988), en particulier dans le cas du modèle gaussien, il est souvent possible de montrer qu'il y a un modèle sous-jacent. Celui-ci permet alors de donner une interprétation du critère et de justifier son choix. C'est ce que nous nous proposons de faire dans cet article avec une méthode simple de classification de données binaires.

Dans le premier paragraphe, nous décrivons cette méthode de classification de données binaires.

Dans le second paragraphe, nous rappelons comment l'approche "classification" peut être utilisée pour identifier un mélange de lois de probabilité (Scott et Symons 1971, Schroeder 1976, Celeux 1988).

Enfin, dans le dernier paragraphe, nous proposons un modèle de mélange pour des données binaires et nous montrons que l'approche classification pour identifier ce modèle correspond à l'algorithme et au critère que nous décrivons dans le premier paragraphe. En outre, en s'appuyant sur des variantes de ce modèle, nous proposons des extensions de l'algorithme de classification de données binaires qui utilisent des distances pondérées par des coefficients variant suivant les classes et les variables (distance adaptative binaire).

## 1. L'ALGORITHME MNDBIN

La méthode de classification des Nuées Dynamiques (Diday et al 1980) repose essentiellement sur l'utilisation de la notion de noyau associé à chaque classe. La nature de ce noyau peut être très varié. Dans le cas le plus simple et si les variables sont quantitatives, le noyau est un élément de l'espace  $\mathbf{R}^P$  contenant l'ensemble à classifier. lorsque les variables ne sont pas quantitatives, généralement on se ramène au cas précédent au moyen d'un changement de codage. Les noyaux fournis par la méthode des Nuées Dynamiques habituellement utilisés dans ce cas ont alors une structure différente des données initiales.

Nous proposons ici d'utiliser la possibilité d'ajouter facilement des contraintes aux noyaux pour lui imposer d'avoir exactement la même structure que les données initiales : les données étant binaires, chaque individu de l'ensemble à classifier peut être considéré comme appartient à  $\{0,1\}^P$ . Il est donc naturel de vouloir représenter chaque classe par un élément de cet ensemble. Il reste alors à choisir une métrique sur cet espace  $\{0,1\}^P$ . Nous utilisons comme distance entre deux individus le nombre de valeurs qui ne sont pas identiques pour les deux vecteurs binaires correspondants. L'algorithme est alors particulièrement simple et le critère minimisé qui en résulte facile à interpréter.

### 1.1. Le problème

$\Omega$  étant un ensemble de  $n$  individus mesurés par  $p$  variables binaires, on cherche une partition de  $\Omega$  en  $K$  classes "homogènes", la valeur  $K$  étant donnée a priori.

On peut sans restriction supposer que les valeurs binaires sont 0 et 1. L'ensemble à classer appartient donc à  $\{0,1\}^p$ .

## 1.2. La méthode des Nuées Dynamiques

Rappelons rapidement le principe de ces méthodes : On suppose que  $\Omega$  appartient à un ensemble  $E$  (par exemple  $\mathbf{R}^p$ ), on définit un ensemble  $L$  de noyaux, une "distance"  $D$  entre les éléments de  $E$  et les noyaux de  $L$ . Le critère  $W$  de classification est alors le suivant :

$$W(P,L) = \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} D(x, a_k)$$

où  $P = (P_1, \dots, P_K)$  et  $L = (a_1, \dots, a_K)$  avec  $a_k \in L$

L'algorithme construit itérativement une suite  $P^0, L^0, P^1, L^1, \dots, P^n, L^n$  de partitions et de noyaux en minimisant à chaque étape le critère. On obtient ainsi à la convergence une partition avec comme résumé pour chaque classe le noyau associé.

Pour utiliser ce type d'algorithme dans le cas des données binaires, on peut soit considérer que l'ensemble des données appartient à  $\mathbf{R}^p$  muni de la distance euclidienne et appliquer la méthode des nuées dynamiques en prenant comme noyau des éléments de  $\mathbf{R}^p$  (méthode des centres mobiles), soit se placer simplement dans l'ensemble  $\Omega$  muni d'une distance quelconque et utiliser la méthode des Nuées Dynamiques sur tableau de distances (ce qui revient à imposer aux noyaux d'appartenir à l'ensemble  $\Omega$ ).

Les deux situations présentent des inconvénients. Dans le premier cas, le résumé de chaque classe et le critère sont difficilement interprétables par rapport aux données initiales ; on n'a pas tenu compte de la forme particulière des données. Dans le second cas, cette fois l'appartenance des noyaux aux données initiales peut sembler trop restrictive et d'autre part cela va conduire à une certaine perte d'efficacité de l'algorithme en place mémoire et en temps (construction et utilisation du tableau de distances sur  $\Omega$ ).

Nous allons nous situer entre ces deux approches. Pour ceci, nous utilisons la possibilité d'imposer des contraintes aux noyaux .

## 1.3. L'algorithme

Nous allons respecter un principe d'homogénéité : les données à classer et les noyaux doivent être de même nature.

L'ensemble  $\Omega$  appartenant à  $\{0,1\}^p$ , nous allons donc imposer aux noyaux d'appartenir à cet espace. Il suffit alors de choisir une distance sur l'espace  $\{0,1\}^p$ . La distance  $d$  que nous avons retenue est le nombre de fois où les coordonnées correspondantes ne sont pas identiques. On peut l'exprimer à l'aide de la distance  $L_1$  ou distance "city-block" sur l'espace  $\{0,1\}^p$  :

$$\forall x \text{ et } y \in \{0,1\}^p \quad d(x,y) = \sum_{j=1}^p |x_j - y_j|$$

où les  $x_j$  et  $y_j$  sont les coordonnées de  $x$  et  $y$ .

Rappelons que le critère que l'on cherche à minimiser est :

$$W(P,L) = \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} d(x, a_k)$$

où  $P = (P_1, \dots, P_K)$  et  $L = (a_1, \dots, a_K)$

L'algorithme se construit alors de la manière habituelle

- *construction des classes (fonction f)* : on range chaque élément de  $\Omega$  dans la classe dont le noyau est le plus proche.
- *construction des noyaux (fonction g)* : on associe à chaque classe  $P_k$  le vecteur binaire  $a_k$  minimisant

$$\sum_{x \in P_k} d(x, a_k)$$

On a

$$\sum_{x \in P_k} d(x, a_k) = \sum_{x \in P_k} \sum_{j=1}^p |x_j - a_k^j| = \sum_{j=1}^p \sum_{x \in P_k} |x_j - a_k^j|$$

$a_k^j$  est donc l'élément majoritaire pour la variable  $j$  dans la classe  $P_k$  (on retrouve la notion de médiane). La construction du noyau est donc très simple.

#### 1.4. Expression du critère à la convergence

A la convergence, le noyau étant fonction de la partition, on peut exprimer le critère uniquement par rapport à la partition. On obtient :

$$W'(P) = W(P,L) = W(P,g(P))$$

$$= \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^p |x_j - a_k^j| = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^p A_j^k$$

où  $A_j^k$  est le nombre d'éléments minoritaires dans la classe  $P_k$  pour la variable  $j$ .

Ce critère représente le nombre de fois où la solution obtenue s'écarte de la situation "idéale".

#### 1.5. Exemple

Soit un ensemble de 10 micro-ordinateurs identifiés par les lettres a à j caractérisés par un ensemble de 10 propriétés identifiées par les nombres 1 à 10. On représente les

données initiales (figure 1) sous forme d'un tableau binaire où un 1 indique que la propriété est vérifiée et un 0 qu'elle ne l'est pas.

Si on applique l'algorithme précédent en demandant 3 classes, on obtient comme partition de l'ensemble des micro-ordinateurs l'ensemble des classes  $\{\{a,d,h\},\{b,e,f,j\},\{c,g,i\}\}$ . On peut représenter cette partition sur les données initiales (figure 2) en réordonnant simplement les lignes de manière à respecter la partition. Les noyaux obtenus sont indiqués dans la figure 3 et le tableau des écarts  $A_j^k$  à la valeur idéale dans la figure 4. La valeur du critère est égale à 15, ce qui indique que sur 100 valeurs initiales du tableau, 15 ne sont pas égales à la valeur idéale représentée par le noyau correspondant.

|   | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|
| a | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1  |
| b | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0  |
| c | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0  |
| d | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0  |
| e | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0  |
| f | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0  |
| g | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1  |
| h | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1  |
| i | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1  |
| j | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0  |

fig. 1  
tableau initial

|   | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|
| a | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1  |
| d | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0  |
| h | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1  |
| b | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0  |
| e | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0  |
| f | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0  |
| j | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0  |
| c | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0  |
| g | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1  |
| i | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1  |

fig. 2  
tableau réordonné

|   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| A | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 |
| B | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| C | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 |

fig. 3  
Les noyaux

|   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| A | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| B | 0 | 0 | 0 | 1 | 2 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| C | 1 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 |

fig. 4  
tableau des écarts

## 1.6. Avantages de la méthode

Les données initiales sont résumées par K vecteurs binaires très facilement interprétables. La qualité du résultat, qui est fournie par la valeur du critère à la convergence, est simple à comprendre puisqu'il représente, nous l'avons vu, le nombre de différences entre les vecteurs binaires de départ et les vecteurs binaires caractérisant leur classe. Le tableau des valeurs  $A_{jk}$  décrites précédemment permet de faire une analyse plus fine des résultats. Il représente en effet la décomposition du critère suivant les classes et les variables. Enfin, on peut montrer que tous ces résultats sont indépendants du codage binaire retenu.

## 1.7. Inconvénients de la méthode

On retrouve les inconvénient de toutes les méthodes de type nuées dynamiques, à savoir le problème du choix des éléments de départ et du nombre de classes.

## 2. L'APPROCHE CLASSIFICATION DE LA DECOMPOSITION DE MELANGE

On reprend ici la présentation de Celeux (1988).

### 2.1. Identification d'un mélange

Le tableau de données de départ de dimension  $(n,p)$  de départ est considéré comme un échantillon  $\Omega$  de taille  $n$  d'une variable aléatoire à valeurs dans  $\mathbf{R}^p$  dont la loi de probabilité admet la fonction de densité

$$f(x) = \sum_{k=1}^K p_k f(x, a_k)$$

$$\text{avec } \forall k = 1, K \quad p_k \in ]0,1[ \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^K p_k = 1$$

où  $f(.,a)$  appartient à une famille de fonctions de densité dépendant du paramètre  $a$ , élément de  $\mathbf{R}^s$  où  $s$  est un entier supérieur ou égal à 1 et  $p_k$  est la probabilité qu'un point de l'échantillon suive la loi  $f(.,a_k)$ .

Le problème posé est l'estimation du nombre  $K$  de composants et des paramètres inconnus  $\{p_k, a_k / k=1, K\}$  au vu de l'échantillon.

### 2.2. Approche classification

Dans l'approche classification (Scott et Symons 1971, Schroeder 1976), on remplace le problème initial d'estimation par le problème suivant :

*Rechercher une partition  $P=(P_1, \dots, P_K)$ ,  $K$  étant supposé connu, telle que chaque classe  $P_k$  soit assimilable à un sous-échantillon qui suit une loi  $f(.,a_k)$ .*

Il s'agit alors de maximiser le critère de vraisemblance classifiante :

$$W(P,a) = \sum_{k=1}^K \text{Log } L(P_k, a_k)$$

où  $a$  est le  $p$ -uplet  $(a_1, \dots, a_p)$  et  $L(P_k, a_k)$  est la vraisemblance du sous-échantillon  $P_k$  suivant la loi  $f(.,a_k)$ .

Pour maximiser ce critère, on peut utiliser des algorithmes de type Nuées Dynamiques qui construisent à partir d'une partition  $P^0$  en  $K$  classes une suite de partitions en appliquant les deux fonctions suivantes :



- une fonction de représentation  $g$  définie par  $g(P) = g(P_1, \dots, P_K) = (a_1, \dots, a_K)$  où  $a_k$  est l'estimation du maximum de vraisemblance du paramètre de la densité associé au sous-échantillon  $P_k$ .
- une fonction d'affectation  $h$  définie par  $h(a) = h(a_1, \dots, a_K) = (P_1, \dots, P_K)$  où  $P_k = \{x \in \Omega / f(x, a_k) \geq f(x, a_m) \text{ avec } k < m \text{ en cas d'égalité}\}$

On peut alors montrer que sous certaines hypothèses, cet algorithme est convergent. On obtient à la convergence une partition  $P$  et une estimation des paramètres  $a_k$ . Les proportions  $p_k$  du mélange sont fournies par les fréquences des classes  $P_k$ .

Cette approche permet, par exemple, de donner une signification dans le cadre gaussien au critère d'inertie interclasse utilisé pour la classification d'individus décrits par des variables quantitatives.

### 3. LE MODELE ASSOCIE AUX DONNEES BINAIRES

#### 3.1. La forme générale

On considère dans ce modèle que les données initiales forment un échantillon de taille  $n$  d'une variable aléatoire à valeurs dans  $\{0,1\}^p$  dont la distribution de probabilité  $p$  est la suivante

$$p(x) = \sum_{k=1}^K p_k p(x/a_k)$$

sachant que

- $\forall k=1, K \quad 0 \leq p_k \leq 1 \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^K p_k = 1$
- $p(. / a_k)$  est une distribution de probabilités sur  $\{0,1\}^p$  appartenant à une famille paramétrée de distributions de probabilités
- $p_k$  est la probabilité qu'un point de l'échantillon suive la distribution de paramètre  $a_k$ . On appellera ces  $p_k$  les proportions du mélange.

En suivant l'approche "classification", rappelée dans le paragraphe précédent pour identifier le mélange, on se ramène à maximiser le critère de vraisemblance classifiante suivant :

$$W(P, a) = \sum_{k=1}^K \text{Log } L(P_k, a_k)$$

où  $a$  est le  $k$ -uplet  $(a_1, \dots, a_K)$  et  $L(P_k, a_k)$  la vraisemblance du sous-échantillon  $P_k$  qui suit la distribution  $p(. / a_k)$ . On a donc

$$L(P_k, a_k) = \prod_{x \in P_k} p(x / a_k)$$

On peut alors utiliser le même algorithme que dans le cas des données continues. A partir d'une partition  $P^0$  en  $K$  classes de l'échantillon, on applique successivement deux fonctions  $g$  et  $h$  jusqu'à l'obtention d'une partition stable :

- la fonction de représentation  $g$  est définie par  $g(P) = g(P_1, \dots, P_K) = (a_1, \dots, a_K)$  où  $a_k$  est l'estimation du maximum de vraisemblance du paramètre de la distribution associée au sous-échantillon  $P_k$ .
- la fonction d'affectation  $h$  est définie par  $f(a) = f(a_1, \dots, a_K) = (P_1, \dots, P_K)$  où  $P_k = \{x \in \Omega / p(x/a_k) \geq p(x/a_m) \text{ avec } k < m \text{ en cas d'égalité}\}$

### 3.2. Choix de la famille de distribution

On suppose que, pour chaque composant du mélange, les  $p$  variables sont indépendantes et que chacune d'entre elles suit une des deux lois de Bernoulli suivantes :

$$\begin{cases} 1 \text{ avec la probabilité } 1-\varepsilon \text{ et } 0 \text{ avec la probabilité } \varepsilon \\ 1 \text{ avec la probabilité } \varepsilon \text{ et } 0 \text{ avec la probabilité } 1-\varepsilon \end{cases}$$

où  $\varepsilon \in ]0, \frac{1}{2}[$ , c'est-à-dire la loi de Bernoulli de paramètre  $(1-\varepsilon)$  et la loi de Bernoulli de paramètre  $\varepsilon$ .

On peut alors écrire

$$p(x/a_k) = \prod_{j=1}^p \varepsilon^{|x_j - a_k^j|} \cdot (1-\varepsilon)^{1-|x_j - a_k^j|}$$

où  $a_k = (a_k^1, \dots, a_k^p)$  et où les  $a_k^j$  indiquent quelle est la distribution retenue :

$$\begin{cases} a_k^j = 1 \text{ pour la première distribution} \\ a_k^j = 0 \text{ pour la seconde distribution} \end{cases}$$

Les paramètres à estimer sont donc les  $a_k^j$  et la valeur  $\varepsilon$ .

### 3.3. Lien avec la distance en valeur absolue sur $\{0,1\}^p$

Si on note  $d$  la distance en valeur absolue sur  $\{0,1\}^p$ , il est facile de montrer que l'on a

$$p(x/a_k) = \varepsilon^{d(x, a_k)} \cdot (1-\varepsilon)^{(p-d(x, a_k))}$$

Le critère de vraisemblance classifiante s'écrit alors

$$W(P, a, \varepsilon) = \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \text{Log} \{ \varepsilon^{d(x, a_k)} \cdot (1-\varepsilon)^{(p-d(x, a_k))} \}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \{ d(x, a_k) \cdot \text{Log}(\epsilon) + (p - d(x, a_k)) \cdot \text{Log}(1 - \epsilon) \} \\
&= \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \left( \text{Log} \frac{\epsilon}{1 - \epsilon} \right) d(x, a_k) + n.p \text{Log}(1 - \epsilon) \\
&= \left( \text{Log} \frac{\epsilon}{1 - \epsilon} \right) \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} d(x, a_k) + n.p \text{Log}(1 - \epsilon)
\end{aligned}$$

Cette expression montre que la recherche de  $\epsilon$  et celle des  $a_k$  sont indépendantes. Pour un  $\epsilon$  fixé, appartenant à  $]0, \frac{1}{2}[$ ,  $\text{Log}(\epsilon/(1-\epsilon))$  est négatif et maximiser le critère  $W(P, a, \epsilon)$  revient donc à minimiser le critère

$$C(P, a) = \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} d(x, a_k)$$

On retrouve ainsi le critère utilisé dans la méthode de classification de données binaires présentée dans le paragraphe 2 et il est facile de montrer que les algorithmes correspondants sont identiques.

On obtient donc une interprétation en terme probabiliste du critère de classification que nous avons proposé pour les données binaires :

D'une part, on considère que les distributions des  $p$  variables sont indépendantes à l'intérieur de chaque classe, c'est-à-dire conditionnellement à l'appartenance à une classe. On retrouve ici l'hypothèse des classes latentes (Goodman 1974, Everitt, 1981).

D'autre part, on suppose que les probabilités de toutes les distributions ne peuvent être que  $\epsilon$  ou  $1 - \epsilon$  où  $\epsilon$  est un paramètre à déterminer. Ceci est un peu l'analogue du choix fait lorsque l'on utilise le critère d'inertie avec une distance euclidienne identifiée. On cherche alors des classes ayant des formes sphériques et de même rayon.

La valeur  $\epsilon$  n'est pas intervenue dans cet algorithme qui minimise le critère  $C(P, a)$ . S'il est nécessaire d'estimer  $\epsilon$ , il suffit de maximiser le critère  $W$  :

$$W(P, a, \epsilon) = \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} d(x, a_k) \left( \text{Log} \left( \frac{\epsilon}{1 - \epsilon} \right) \right) + n.p \text{Log}(1 - \epsilon).$$

Si on note  $e$  la valeur du critère  $C(P, a)$  obtenu à la convergence de l'algorithme, on obtient :

$$W(P, a, \epsilon) = (n.p - e) \text{Log}(1 - \epsilon) + e \text{Log}(\epsilon).$$

Nous verrons plus loin que la valeur  $\epsilon$  maximisant cette quantité est  $\frac{e}{n.p}$ .

### 3.4. Généralisation à une distance $L_1$ adaptative : une seule distance

On se place exactement dans les mêmes conditions que dans le premier modèle, mais en remplaçant la valeur réelle  $\epsilon$  par un vecteur  $\epsilon$  formé de  $p$  valeurs  $\epsilon_j$  dépendant de chaque variable.

$$p\{x / (a_k, \epsilon)\} = \prod_{j=1}^p \{ (\epsilon_j)^{|x^j - a_k^j|} (1 - \epsilon_j)^{1 - |x^j - a_k^j|} \} \quad \text{où } \epsilon_j \in ]0, \frac{1}{2}[.$$

Le critère de vraisemblance classifiante va alors s'écrire

$$\begin{aligned} W(P, a, \epsilon) &= \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \sum_{j=1}^p \{ (\text{Log} \frac{\epsilon_j}{1 - \epsilon_j}) |x^j - a_k^j| + \text{Log}(1 - \epsilon_j) \} \\ &= \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \{ - \sum_{j=1}^p (\text{Log} \frac{1 - \epsilon_j}{\epsilon_j}) |x^j - a_k^j| \} + n. \sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_j) \end{aligned}$$

Le critère se met alors sous la forme  $-\sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} d_\epsilon(x, a_k) + A$  où  $d_\epsilon$  est une distance

de type  $L_1$  pondérée par les quantités  $(\text{Log} \frac{1 - \epsilon_j}{\epsilon_j})$  qui dépendent du vecteur  $\epsilon$  et  $A$  est la

quantité  $n. \sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_j)$  qui ne dépend pas du point  $x$ .

Remarquons que l'on obtient bien une distance  $L_1$  pondérée car les quantités  $(\text{Log} \frac{1 - \epsilon_j}{\epsilon_j})$  sont nécessairement positives.

♦ *fonction d'affectation (recherche des classes)*

Le second terme  $A$  est constant lors de cette étape. Puisqu'on cherche à maximiser le critère  $W$ , on affectera les points aux "centres" les plus proches au sens d'une distance

$L_1$  pondérée par les valeurs  $\text{Log} \frac{1 - \epsilon_j}{\epsilon_j}$ .

♦ *fonction de représentation (recherche des  $a_k^j$  et des  $\epsilon_j$ )*

Quelles que soient les valeurs  $\epsilon_j$  obtenues, il est facile de montrer que les  $a_k^j$  sont nécessairement les valeurs majoritaires de chaque classe pour chaque variable. Il ne reste plus qu'à déterminer les  $\epsilon_j$ . Il faut donc maximiser :

$$W(P, a, \epsilon) = \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \{ - \sum_{j=1}^p (\text{Log} \frac{1 - \epsilon_j}{\epsilon_j}) |x^j - a_k^j| \} + n. \sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_j)$$

avec  $a_k^j$  valeur majoritaire.

On peut écrire

$$W(P, a, \epsilon) = - \sum_{j=1}^p (\text{Log} \frac{1 - \epsilon_j}{\epsilon_j}) e_j + n. \sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_j)$$

où  $e_j$  est le nombre de fois où la valeur majoritaire n'a pas été prise dans une classe.

$$W(P, a, \epsilon) = \sum_{j=1}^p \{ (n - e_j) (\text{Log}(1 - \epsilon_j) + e_j \text{Log}(\epsilon_j)) \} = \sum_{j=1}^p \phi(\epsilon_j)$$

Il faut donc maximiser la fonction  $\phi$ .

$$\Phi'(\epsilon_j) = \frac{-(n - e_j)}{1 - \epsilon_j} + \frac{e_j}{\epsilon_j} = \frac{e_j - n \epsilon_j}{(1 - \epsilon_j) \epsilon_j}$$

Le maximum est atteint pour  $\epsilon_j = \frac{e_j}{n}$  qui appartient bien à l'intervalle  $]0, \frac{1}{2}[$  sauf dans le cas très particulier où  $e_j = 0$ .

Cette approche est similaire à la méthode des distances adaptatives avec une distance unique (Govaert 1975 et 1977).

On peut aller plus loin et généraliser encore en prenant une distance différente pour chaque classe.

### 3.5. Distance $L_1$ adaptative : cas général

On reprend le même modèle, mais cette fois avec des valeurs  $\epsilon$  qui peuvent dépendre à la fois des classes et des variables.

$$p(x / (a_k, \epsilon_k)) = \prod_{j=1}^p (\epsilon_k^j)^{|x^j - a_k^j|} \cdot (1 - \epsilon_k^j)^{1 - |x^j - a_k^j|}$$

où  $\epsilon_k^j \in ]0, \frac{1}{2}[$ .

Le critère de vraisemblance classifiante va alors s'écrire

$$W(P, a, \epsilon) = \sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \left\{ - \sum_{j=1}^p \text{Log} \frac{1 - \epsilon_k^j}{\epsilon_k^j} |x^j - a_k^j| + \sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_k^j) \right\}$$

De manière analogue au paragraphe précédent, le critère se met encore sous la forme

$$\sum_{k=1}^K \sum_{x \in P_k} \left\{ d_{\epsilon_k}(x, a_k) + A \right\}$$

où  $d_{\epsilon_k}$  est une distance de type  $L_1$  pondérée par les quantités  $\text{Log} \frac{1 - \epsilon_k^j}{\epsilon_k^j}$  qui dépendent

du vecteur  $\epsilon_k$  et  $A$  est la quantité  $\sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_k^j)$  qui ne dépend du point  $x$ .

Les distances de type  $L_1$  utilisées sont, comme dans le cas précédent, pondérées par des coefficients qui peuvent évoluer au cours des itérations de l'algorithme, mais cette fois, en plus, les distances sont différentes suivant les classes.

♦ *fonction d'affectation (recherche des classes)*

Cette fois , le second terme dépend de k et aura donc une influence. On affectera x à la classe k qui minimise

$$d_{\epsilon_k}(x, a_k) - \sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_k^j)$$

Remarque : Sachant que  $\sum_{j=1}^p \text{Log}(1 - \epsilon_k^j) = \text{Log} \prod_{j=1}^p (1 - \epsilon_k^j)$ , si on impose aux coefficients de la distance la contrainte  $\prod_{j=1}^p (1 - \epsilon_k^j) = 1$ , on obtient cette fois une

affectation qui ne dépend que de la distance et nous nous retrouvons exactement dans la situation habituelle des Nuées Dynamiques. Ceci est à rapprocher de la comparaison entre la méthode des distances adaptatives dans le cas euclidien et la méthode de reconnaissance des mélanges de lois normales (Schroeder, 1976). Dans le premier cas, une contrainte (le déterminant de la matrice définissant la métrique devait être constant) permettait d'utiliser l'algorithme habituel alors que dans le second cas, où aucune contrainte n'était imposée, un terme additif venant en complément d'une métrique apparaissait dans le critère comme ici.

♦ *fonction de représentation (recherche des  $a_k^j$  et des  $\epsilon_k^j$ )*

Comme dans les situations précédentes, quels que soient les coefficients  $\epsilon$ , les meilleurs  $a_k^j$  sont les médianes par classe et par variable. Il reste à trouver les  $\epsilon_k^j$  maximisant, pour chaque classe  $P_k$  et chaque variable j, la quantité :

$$C = \sum_{x \in P_k} \left\{ - \left( \text{Log} \frac{1 - \epsilon_k^j}{\epsilon_k^j} \right) |x^j - a_k^j| + \text{Log}(1 - \epsilon_k^j) \right\}$$

$$C = - \left( \text{Log} \frac{1 - \epsilon_k^j}{\epsilon_k^j} \right) e_k^j + n_k \cdot \text{Log}(1 - \epsilon_k^j)$$

où  $e_k^j$  est le nombre de fois où la valeur majoritaire n'a pas été prise dans la classe k pour la variable j et  $n_k$  le cardinal de la classe  $P_k$ .

$$C = (n_k - e_k^j) \text{Log}(1 - \epsilon_k^j) + e_k^j \text{Log}(\epsilon_k^j)$$

Le maximum est atteint pour  $\varepsilon_k^j = \frac{e_k^j}{n_k}$

En fait, avec cette dernière généralisation, on retrouve le modèle des classes latentes dans le cas le plus général traité par Celeux (1988).

Rappelons que l'hypothèse du modèle des classes latentes (Goodman 1974, Everitt 1981) est la suivante : il existe une variable qualitative ("cachée") à K modalités, telle que conditionnellement à la connaissance de l'une de ses modalités, les p variables soient mutuellement indépendants. Le modèle s'écrit alors :

$$f(x) = \sum_{k=1}^K p_k p(x/\alpha_k)$$

$$\text{avec } \forall k = 1, K \quad p_k \in ]0,1[ \quad , \quad \sum_{k=1}^K p_k = 1$$

$$\text{et } p(x/\alpha_k) = \prod_{j=1}^p (\alpha_k^j)^{x_j} \cdot (1-\alpha_k^j)^{1-x_j} \quad \text{où } \alpha_k^j \in ]0,1[$$

On retrouve bien notre modèle ; en effet, nous avons

$$f(x) = \sum_{k=1}^K p_k \cdot f(x, a_k, \varepsilon_k)$$

avec

$$f(x, a_k, \varepsilon_k) = \prod_{j=1}^p \varepsilon_k^j |x_j - a_k^j| \cdot (1 - \varepsilon_k^j)^{1 - |x_j - a_k^j|} \quad \text{où } \forall j \text{ et } k \quad \varepsilon_k^j \in [0, \frac{1}{2}]$$

Il suffit de poser

$$\text{- si } \alpha_k^j \in [0, \frac{1}{2}[ \quad \varepsilon_k^j = \alpha_k^j \quad \text{et} \quad a_k^j = 0$$

$$\text{- si } \alpha_k^j \in ]\frac{1}{2}, 1] \quad \varepsilon_k^j = 1 - \alpha_k^j \quad \text{et} \quad a_k^j = 1.$$

Remarque :

Lorsque les données sont mises sous la forme d'un tableau disjonctif complet, Celeux (1988) a établi que l'identification d'un modèle de K classes latentes était équivalent à la recherche de la partition en K classes maximisant le critère d'information mutuelle.

D'autre part, il est connu que ce critère est très proche du  $\chi^2$  de contingence, critère maximisé par l'algorithme MNDQAL (Ralambondrainy 1988). Lorsque les données sont binaires, il apparait donc un lien très étroit entre l'algorithme MNDBIN adaptatif et l'algorithme MNDQAL, le premier maximisant l'information mutuelle, le second le  $\chi^2$  de contingence. Dans ce cas, nous pensons que la première approche présente certains avantages : on travaille directement sur le tableau binaire sans avoir besoin de le dédoubler ; les noyaux nécessairement binaires sont simples à interpréter ; enfin on a

une signification de l'algorithme en terme statistique, puisqu'il s'agit de l'identification d'un modèle de mélange de distributions de Bernoulli sous l'approche "classification".

## CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons établi comment l'algorithme de classification MNDBIN était lié à un modèle précis de mélange de données binaires. Ce lien permet d'expliquer les bons résultats que nous avons obtenus à l'aide de cet algorithme sur des données simulées qui justement suivaient ce modèle.

Cette approche permet aussi de justifier a posteriori l'utilisation pour les données binaires, d'une part de la distance en valeur absolue, d'autre part de noyaux binaires.

Enfin, l'extension de ce modèle permet de proposer de nouveaux algorithmes utilisant des distances adaptatives de type  $L_1$  qui restent à développer et à expérimenter.

## Bibliographie

DIDAY E. et COLLABORATEURS. (1980), "Optimisation en Classification Automatique". INRIA. Rocquencourt.

DIDAY E. et GOVAERT G. (1977), "Classification avec distances adaptatives". RAIRO, V-11, n°4, pp. 329-349.

CELEUX G. (1988), "Classification et modèles". R.S.A. Vol 36, n°3.

EVERITT B. (1981), "An introduction to latent variable models". Chapman and Hall.

GOODMAN L. (1974), "Exploratory latent structure models using both identifiable and unidentifiable models". Biometrika 61.

GOVAERT G. (1975), "Classification Adaptative". Thèse de 3<sup>ème</sup> cycle, Paris 6.

RALAMBONDRAINY H. (1988), "Etude des données qualitatives par les méthodes typologiques. Actes du congrès de l'association française de marketing. Montpellier, mai 1988.

SCHROEDER A. (1976), "Analyse d'un mélange de distribution de probabilité de même type". RSA, Vol 24. n°1.

SCOTT A., SYMONS M. (1971), "Clustering methods based on likelihood ratio criteria". Biometrics 27.

Imprimé en France

par

l'Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique



